

ĐIỀU KIỆN BIÊN VẬN TỐC TRƯỢT BẬC HAI MỚI CHO MÔ PHÒNG DÒNG KHÍ LOÃNG TỐC ĐỘ CAO

LÊ TUẤN PHƯƠNG NAM

Khoa Công nghệ Cơ khí, Trường Đại học Công nghiệp Thành phố Hồ Chí Minh,

letuanphuongnam@iuh.edu.vn

Tóm tắt. Trong bài báo này, một điều kiện biên trượt vận tốc bậc hai mới được đề xuất dựa trên sự kết hợp giữa mô hình hấp thụ hạt khí đẳng nhiệt Langmuir trên bề mặt rắn và mô hình khí động học Karniadakis *et al.* Điều kiện biên trượt vận tốc bậc hai mới này được tích hợp vào trong phần mềm mã mở OpenFOAM để dùng với bộ giải rhoCentralFoam mà giải các phương trình Navier-Stokes-Fourier cho mô phỏng dòng khí loãng. Hai trường hợp cơ bản để kiểm chứng điều kiện biên trượt vận tốc mới cho tính toán mô phỏng dòng khí loãng ở tốc độ cao trên tấm phẳng và dòng khí loãng đi ngang qua hình trụ tròn. Các dòng khí loãng argon và ni-tơ ở tốc độ cao (số Mach từ 4 – 10) được lựa chọn để thực hiện mô phỏng cho hai trường hợp trên. Kết quả mô phỏng CFD cho tính toán vận tốc trượt trên bề mặt của dòng khí loãng với điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai mới trên bề mặt thì tiệm cận với kết quả DSMC cho tất cả các trường hợp được xem xét trong bài báo và tốt hơn kết quả vận tốc trượt tính toán với điều kiện trượt vận tốc bậc hai Karniadakis *et al.*

Từ khóa. Điều kiện biên trượt vận tốc bậc hai mới, hấp thụ khí đẳng nhiệt Langmuir, tấm phẳng, hình trụ tròn, vận tốc trượt.

NEW SECOND-ORDER SLIP BOUNDARY CONDITION FOR SIMULATING HIGH-SPEED RAREFIED GAS FLOWS

Abstract. In this paper, a new second-order slip boundary condition is proposed based on a combination of the Langmuir isothermal adsorption model on the solid surface and model of kinetic theory of gases. This new second-order slip condition is implemented into the open-source OpenFOAM software to employ with the rhoCentralFoam solver that solves Navier-Stokes-Fourier equations. Two basic cases to verify this new slip condition are the flat plate and circular cylinder in cross-flows. High-speed rarefied gas flows (Mach numbers 4 - 10) are selected to perform the simulations for the above two cases with working gases as argon and nitrogen. The results of the CFD slip velocities using new slip condition of gas flows over the surface are close to the DSMC results for all the cases considered, and they are better than those of the second-order slip condition published previously.

Keywords. New second-order slip condition, Langmuir isothermal adsorption, flat plate, circular cylinder, slip velocity.

1 GIỚI THIỆU CHUNG

Tham số cơ bản được dùng để mô tả các chế độ của dòng khí loãng, là số Knudsen, Kn. Nó được định nghĩa là tỷ lệ của khoảng cách trung bình tự do của các hạt khí trước khi va chạm lẫn nhau với chiều dài đặc trưng vật thể (ví dụ như chiều dài của tấm phẳng hoặc đường kính của hình trụ tròn). Các dòng khí loãng có bốn chế độ: chế độ môi trường liên tục, $Kn < 0.01$; chế độ trượt $0.01 \leq Kn \leq 0.1$; chế độ chuyển tiếp $0.1 \leq Kn \leq 1$; và chế độ hạt khí tự do $Kn \geq 1$. Hai phương pháp điển hình để giải quyết các dòng khí loãng là phương pháp tính toán khí động lực học (CFD) và phương pháp mô phỏng trực tiếp Monte-Carlo (DSMC). Phương pháp CFD, giải các phương trình Navier - Stokes - Fourier (N-S-F), mô phỏng thành công các dòng khí loãng trong chế độ môi trường liên tục ($Kn < 0.01$). Kết hợp giữa phương trình N-S-F và các điều kiện biên trượt có thể mô phỏng thành công dòng khí loãng trong chế độ trượt, lên đến số Kn của 0.1. Ngoài chế độ trượt, các phương trình N-S-F không thể mô phỏng được các dòng khí loãng do giả thuyết môi trường liên tục bị phá vỡ. Trong khi đó, phương pháp DSMC có thể mô phỏng thành công các dòng khí loãng của bốn chế độ ở trên nhưng chi phí tính toán của phương pháp DSMC rất tốn kém.

Mô phỏng dòng khí loãng là một công cụ trong tính toán và thiết kế các phương tiện bay ở tốc độ cao. Các điều kiện trượt bậc hai của vận tốc đã được phát triển trong [1-4] cho CFD để mô phỏng dòng khí loãng ở tốc độ cao. Một vấn đề của điều kiện trượt bậc hai trong [1-4] là các giá trị tự do của các hệ số bậc nhất và bậc hai. Các điều kiện biên trong [1-4] được đề xuất dựa trên lý thuyết động học của khí và chưa xem xét sự hấp thụ của các hạt khí trên bề mặt rắn. Một điều kiện biên vận tốc trượt thứ hai được đề xuất trong [5] bằng cách xem xét sự tích tụ của các hạt khí trên bề mặt rắn vào mô hình lý thuyết động học của chất khí được đề xuất bởi Karniadakis *et al.* trong [10]. Điều kiện biên trượt bậc hai đã được hiệu chỉnh này đã cho kết quả mô phỏng tốt đối với các vi dòng khí loãng Poiseuille ở tốc độ thấp. Trong công việc hiện tại, chúng tôi xem xét đến sự hấp thụ hạt khí đẳng nhiệt Langmuir [6-8] vào mô hình Karniadakis *et al.* để phát triển điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai mới để sử dụng với các phương trình N-S-F. Hơn nữa, chúng tôi cũng xem xét sự đóng góp của khuếch tán bề mặt gây ra bởi các hạt khí được hấp thụ trên bề mặt rắn để tính toán khoảng cách tự do trung bình giữa các hạt khí [9]. Trong bài báo này, các mô phỏng số 2D về các điều kiện biên trượt bậc hai của vận tốc và nhiệt độ Smoluchowski được nghiên cứu. Các trường hợp mô phỏng là dòng khí loãng ni-tơ và argon đi ngang qua hình trụ tròn [10] và trên tấm phẳng [11, 12]. Kết quả mô phỏng CFD sử dụng điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai mới được so sánh vận tốc tính toán với các điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai được phát triển từ mô hình Karniadakis *et al.* [1] và dữ liệu DSMC.

2 ĐIỀU KIỆN BIÊN VẬN TỐC TRƯỢT BẬC HAI XEM XÉT SỰ HẤP PHỤ ĐẲNG NHIỆT LANGMUIR

Một mô hình động học của khí đã được phát triển trong [1] bởi Karniadakis *et al.* để phát triển điều kiện biên trượt bậc hai Karniadakis *et al.* và được trình bày lại ở đây. Trong mô hình này, Karniadakis *et al.* giả định rằng một nửa các hạt khí đến từ khoảng cách trung bình tự do của hạt khí tới bề mặt với vận tốc, \mathbf{u}_λ và nửa còn lại của các hạt khí được phản xạ từ bề mặt. Mô hình này giả định rằng 1) không có sự tích tụ hoặc ngưng tụ của các hạt khí trên bề mặt và 2) vận tốc nhiệt trung bình của khí \bar{v} , ở bề mặt trượt, bề mặt rắn và ở khoảng cách trung bình tự do của hạt khí tới bề mặt là bằng nhau [1]. Số lượng hạt khí đi qua bề mặt trượt, n_s là tổng của n_λ và n_w , và được tính như sau [1]:

$$n_w = n_\lambda = \frac{1}{2}n_s, \quad (1)$$

trong đó các chỉ số w và λ biểu thị số lượng hạt khí ở bề mặt rắn và ở khoảng cách trung bình tự do của hạt khí tới bề mặt rắn tương ứng. Trong điều kiện trượt, hệ số động lượng tiếp tuyến, σ_u , được giới thiệu. Giá trị của nó thay đổi từ 0 đến 1 và cho biết tỷ lệ các hạt khí được phản xạ từ bề mặt không thay đổi vận tốc, $(1 - \sigma_u)$ hoặc có sự thay đổi vận tốc sau khi va chạm bề mặt rắn, σ_u . Theo giả định của cân bằng động lượng tiếp tuyến tại mặt phẳng trượt, s , ta có [1]

$$\frac{1}{4}n_s m \bar{v} \mathbf{u} = \frac{1}{4}n_\lambda m \bar{v} \mathbf{u}_\lambda + \frac{1}{4}n_w m \bar{v} [(1 - \sigma_u) \mathbf{u}_\lambda + \sigma_u \mathbf{u}_w], \quad (2)$$

Trong đó \mathbf{u} là vận tốc trượt và m là khối lượng một hạt khí. Thay thế phương trình (1) vào phương trình (2), chúng ta có [1]

$$\mathbf{u} = \frac{1}{2} [\mathbf{u}_\lambda + (1 - \sigma_u) \mathbf{u}_\lambda + \sigma_u \mathbf{u}_w], \quad (3)$$

Bây giờ chúng ta mở rộng \mathbf{u}_λ trong phương trình (3) theo \mathbf{u} sử dụng chuỗi khai triển Taylor đến bậc hai [1],

$$\mathbf{u}_\lambda = \mathbf{u} + \lambda \nabla_{\mathbf{n}} \mathbf{u} + \frac{1}{2} \lambda^2 \nabla_{\mathbf{n}}^2 \mathbf{u} + \dots, \quad (4)$$

mà $\nabla_{\mathbf{n}}$ là gradient pháp tuyến và \mathbf{n} là véc tơ pháp tuyến hướng tới bề mặt. Thay thế phương trình (4) vào phương trình (3) để đạt điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai Karniadakis *et al.* là [1],

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_w + \frac{2 - \sigma_u}{\sigma_u} \lambda \nabla_n \mathbf{u} + \frac{1}{2} \frac{2 - \sigma_u}{\sigma_u} \lambda^2 \nabla_n^2 \mathbf{u}. \quad (5)$$

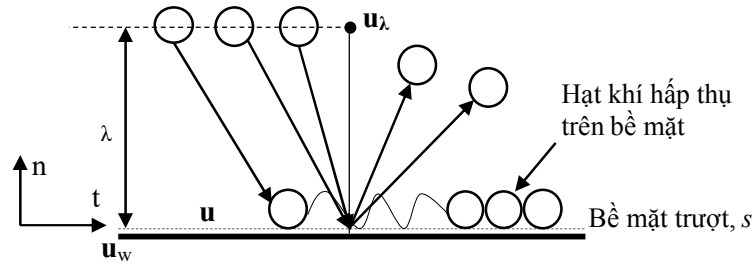
Bây giờ chúng ta xem xét lại giả định rằng không có sự tích tụ hoặc ngưng tụ của các hạt khí trên bề mặt trượt. Trong thực tế, có sự hấp thụ của các hạt khí ở bề mặt. Để mô tả quá trình hấp thụ này, lý thuyết sự hấp thụ khí đẳng nhiệt Langmuir được giới thiệu. Trong mô hình Langmuir, các giả định được đưa ra như sau: 1) sự hấp thụ của hạt khí trong một lớp đơn trên bề mặt, 2) tất cả các vị trí bề mặt là tương đương và chỉ chứa một hạt khí bị hấp phụ, và 3) không có tương tác giữa các hạt khí hấp thụ trên bề mặt để rời khỏi bề mặt. Mô hình hấp thụ Langmuir này đã được dùng để phát triển điều kiện biên vận tốc trượt bậc nhất trong [6-8]. Mô hình tương tác giữa hạt khí – bề mặt rắn của công việc hiện tại được thể hiện trong hình 1. Sau khi xem xét sự hấp thụ của các hạt khí trên bề mặt rắn, và khi đó số lượng hạt khí n_λ và n_w được xác định lại như sau:

$$n_\lambda = (1 - \theta) \frac{1}{2} n_s, \quad (6)$$

và

$$n_w = (1 + \theta) \frac{1}{2} n_s, \quad (7)$$

Trong đó θ là tỷ lệ che phủ bề mặt ($0 \leq \theta \leq 1$) mà chỉ số lượng các vị trí của bề mặt rắn được phủ bằng các hạt khí hấp thụ. Tỷ lệ các vị trí của bề mặt rắn không có các hạt khí hấp thụ là $(1 - \theta)$. Giá trị của θ được tính bằng phương pháp hấp thụ khí đẳng nhiệt Langmuir mà được mô tả dưới đây.



Hình 1: Mô hình tương tác bề mặt gas khí.

Sự hấp thụ của các hạt khí trên bề mặt rắn được xem như là một loại phản xạ khuếch tán [8, 13], và bị bỏ qua trong điều kiện vận tốc trượt bậc hai Karniadakis *et al.* Vì vậy, các hạt khí được hấp phụ phải được xem xét đến trong điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai mới. Hơn nữa, chúng tôi tuân theo giả định trong chỉ nên xem xét các hạt khí phản xạ có thay đổi vận tốc (i.e. $\sigma_u = 1$) để phát triển điều kiện biên trượt. Thay thế các phương trình. (4), (6) và (7) vào phương trình. (2) với $\sigma_u = 1$, chúng ta có,

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_w + \frac{1 - \theta}{1 + \theta} \lambda \nabla_n \mathbf{u} + \frac{1}{2} \frac{1 - \theta}{1 + \theta} \lambda^2 \nabla_n^2 \mathbf{u}. \quad (8)$$

Trong quá trình hấp thụ khí đẳng nhiệt Langmuir, các hạt khí va chạm vào vị trí trên bề mặt bị hấp thụ bởi các hạt khí làm các hạt khí trên bề mặt di chuyển và sẽ gây ra sự khuếch tán bề mặt. Nó góp phần tính toán khoảng cách trung bình tự do các hạt khí ở bề mặt [9]. Chúng tôi giả định rằng xem xét sự khuếch tán bề mặt mà các hạt khí hấp thụ không rời khỏi bề mặt, khi đó khoảng cách trung bình tự do các hạt khí ở bề mặt được biểu diễn như một hàm của hệ số tỷ lệ che phủ bề mặt [9], $\lambda/(1 - \theta)$ và thay thế vào phương trình. (8), điều kiện trượt bậc hai mới được thể hiện như sau:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_w + \frac{\lambda}{1 + \theta} \nabla_n \mathbf{u} + \frac{1}{2} \frac{\lambda^2}{1 - \theta^2} \nabla_n^2 \mathbf{u}. \quad (9)$$

Trong đó số hạng, λ_s , trong lý thuyết động học của khí được tính bằng [13]

$$\lambda = \frac{\mu}{\rho} \sqrt{\frac{\pi}{2RT}}, \quad (10)$$

mà μ là độ nhớt; ρ là mật độ; R là hằng số khí cụ thể; và T là nhiệt độ.

Tính toán tỷ lệ độ che phủ bề mặt, θ , theo sự hấp thụ khí đẳng nhiệt Langmuir được trình bày. Nó tỷ lệ thuận với áp suất, p và phụ thuộc vào nhiệt độ bề mặt rắn T_w , được tính như sau:

Đối với khí đơn phân tử như khí argon [6-8]

$$\theta = \frac{\beta p}{1 + \beta p}. \quad (11)$$

Đối với khí đôi phân tử như khí ni-tơ hoặc ô-xy [6-8], các hạt khí tiếp cận bề mặt có thể được hấp phụ trên bề mặt chỉ khi có hai vị trí trống trên bề mặt. Xác suất cho hai vị trí trống trên bề mặt là $(1 - \theta)^2$. Do đó tốc độ hấp thụ tỷ lệ với $(1 - \theta)^2$. Tỷ lệ mà một hạt khí sẽ ở trong một vị trí nhất định là θ và khả năng các hạt khí sẽ ở các vị trí liền kề là θ^2 . Vì vậy trị số θ cho khí đôi phân tử có thể được tính như sau [6-8]:

$$\theta = \frac{\sqrt{\beta p}}{1 + \sqrt{\beta p}}, \quad (12)$$

Trong đó β , là tham số liên quan đến nhiệt độ bề mặt, T_w và lượng nhiệt hấp thụ, D_e và được tính như sau [8]:

$$\beta = \frac{A\lambda}{R_u T_w} \exp\left(\frac{D_e}{R_u T_w}\right), \quad (13)$$

trong đó A được tính xấp xỉ bằng $N_A \pi d_c^2 / 4$ (m^2/mol) đối với chất khí [18]; d_c là đường kính Covalent của hạt khí [8]; R_u là hằng số chung của các loại khí ($J/(kmol \cdot K)$); N_A là số Avogadro; và D_e là nhiệt hấp thụ, $D_e = 5255$ (J/mol) đối với khí argon và ni-tơ [6-8].

Độ nhớt được tính theo luật Sutherland [8, 13],

$$\mu = A_s \frac{T^{1.5}}{T + T_s}, \quad (14)$$

mà A_s và T_s là các hệ số: $A_s = 1.93 \times 10^{-6}$ Pas $K^{-1/2}$ và $T_s = 142K$ cho khí argon [8]; $A_s = 1.41 \times 10^{-6}$ Pas $K^{-1/2}$ và $T_s = 111K$ cho khí ni-tơ [8].

Điều kiện biên trượt cho nhiệt độ Smoluchowski được phát triển từ sự truyền nhiệt trên bề mặt theo hướng pháp tuyến và có thể được viết [14]:

$$T + \frac{2 - \sigma_T}{\sigma_T} \frac{2\gamma}{(\gamma + 1)Pr} \lambda \nabla_n T = T_w, \quad (15)$$

trong đó γ là tỷ lệ nhiệt cụ thể; Pr là số Prandtl; và σ_T là hệ số lưu nhiệt thay đổi từ 0 đến 1. Trao đổi năng lượng hoàn hảo giữa khí và bề mặt rắn tương ứng với $\sigma_T = 1$, và không trao đổi năng lượng, $\sigma_T = 0$.

Việc dự đoán chính xác vận tốc trượt của dòng khí trên bề mặt sẽ tăng độ chính xác trong việc dự đoán truyền nhiệt trên bề mặt phương tiện bay ở tốc độ cao do xảy ra hiện tượng sinh nhiệt nhớt trên bề mặt [15]. Điều này sẽ giúp cho việc thiết kế hệ thống bảo vệ nhiệt tốt hơn cho các phương tiện bay ở tốc độ cao.

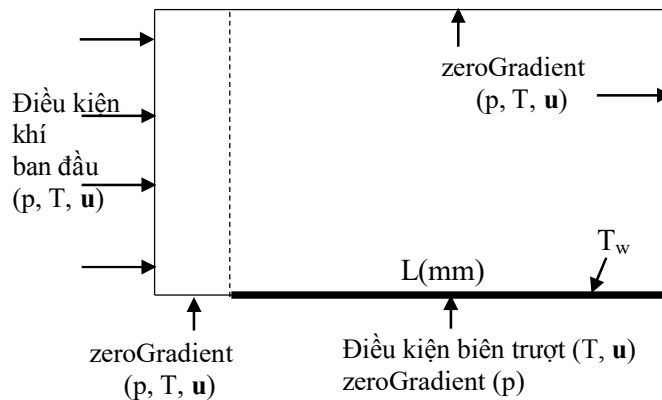
Các điều kiện biên trượt vận tốc và nhiệt độ (i.e. các phương trình (5), (9), và (15)) được tích hợp trong OpenFOAM [16] để dùng với bộ giải rhoCentralFoam mà giải các phương trình N-S-F để mô phỏng các dòng khí loãng.

3 KẾT QUẢ MÔ PHỎNG VÀ THẢO LUẬN

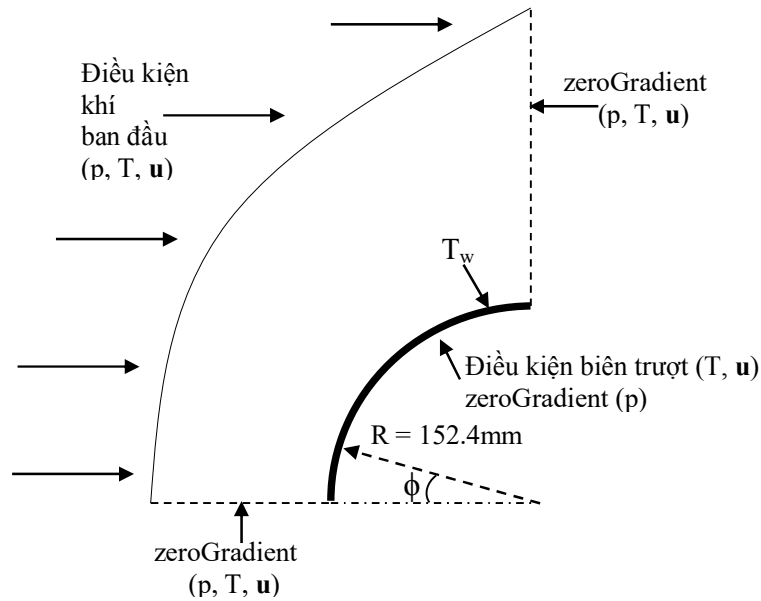
Hai mô hình số được thiết lập cho mô phỏng dòng khí loãng ở tốc độ cao với các điều kiện biên trượt trong các trường hợp tấm phẳng và hình trụ tròn được thể hiện trong các hình 2 và 3. Trong trường hợp hình trụ tròn, các mô phỏng được thực hiện cho một phần tư phía trước hình trụ ($0^\circ \leq \phi \leq 90^\circ$). Các điều kiện biên trượt được áp dụng trên các bề mặt rắn cho nhiệt độ và vận tốc của dòng khí (T, \mathbf{u}). Điều kiện biên cho áp suất, p , tại các bề mặt là zeroGradient (i.e. gradient của áp suất theo hướng pháp tuyến là zero). Tại biên của dòng khí vào, các điều kiện ban đầu của dòng khí loãng được duy trì trong suốt quá trình tính toán. Ở biên của miền trên, ra và phía trước vật thể, dòng khí được phép rời khỏi vùng tính toán; điều kiện biên zeroGradient được áp dụng cho (p, T, \mathbf{u}) tại các biên này. Các điều kiện dòng khí loãng ban đầu cho tấm phẳng và hình trụ như số Mach, Ma , nhiệt độ, áp suất p , được hiển thị trong Bảng 3. Lưới cho mô phỏng tấm phẳng là lưới cấu trúc hình chữ nhật thông thường và kích thước lưới cuối cùng là $\Delta x = \Delta y = 0.0767\text{mm}$ [8]. Lưới cấu trúc cho mô phỏng hình trụ có kích thước phần tử nhỏ nhất gần bề mặt là $\Delta x = 2.40\text{ mm}$, $\Delta y = 0.05\text{ mm}$ [8].

Bảng 1: Điều kiện ban đầu dòng khí loãng trong các mô phỏng số.

Trường hợp	Ma	\mathbf{u} (m/s)	T (K)	p(Pa)	λ (mm)	T_w (K)	Khí	Kn
Tấm phẳng [11]	4	631	64.5	3.73	0.23	292	Argon	0.005
Tấm phẳng [12]	6.1	1129	83.4	2.97	0.35	294	Ni-tơ	0.004
Hình trụ [10]	10	2624	200	1.17	3.04	500	Argon	0.01
Hình trụ [10]	10	2883	200	1.17	3.04	500	Ni-tơ	0.01



Hình 2: Mô hình mô phỏng số của tấm phẳng.

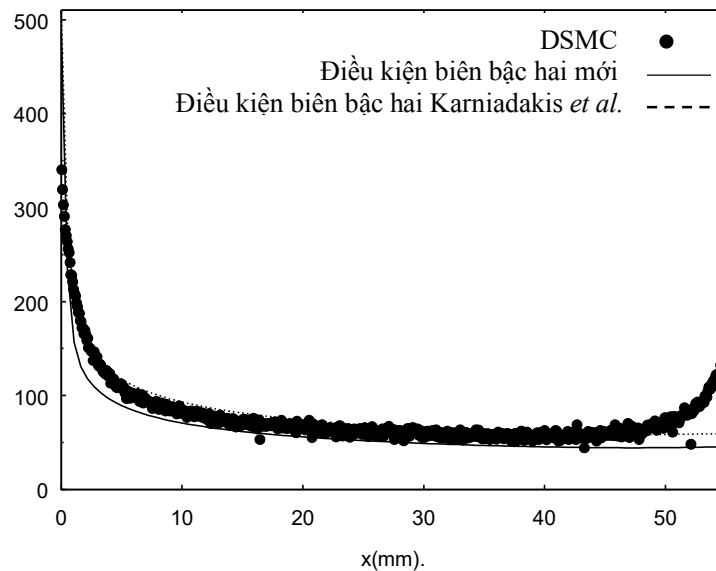


Hình 3: Mô hình mô phỏng số của hình trụ.

Mỗi trường hợp hoặc cho hình trụ hoặc cho tấm phẳng sẽ có hai mô phỏng CFD được thực hiện với các điều kiện biên trượt khác nhau cho (T, \mathbf{u}) như sau: 1) điều kiện biên trượt bậc hai Karniadakis *et al.* cho vận tốc và điều kiện Smoluchowski cho nhiệt độ, và 2) điều kiện biên trượt bậc hai mới cho vận tốc và điều kiện Smoluchowski cho nhiệt độ. Kết quả tính toán của vận tốc trượt của hai điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai sẽ được so sánh với dữ liệu DSMC được mô phỏng từ bộ giải dsmeFoam trong OpenFOAM. Các giá trị $\sigma_u = \sigma_T = 1$ được dùng cho tất cả mô phỏng CFD và DSMC.

3.1 Trường hợp tấm phẳng

Vận tốc trượt của dòng khí argon và ni-tơ trên bề mặt tấm phẳng được trình bày trong hai hình 4 và 5, tương ứng. Tất cả các kết quả mô phỏng DSMC và CFD đều đạt được các giá trị cực đại ở đầu tấm phẳng.

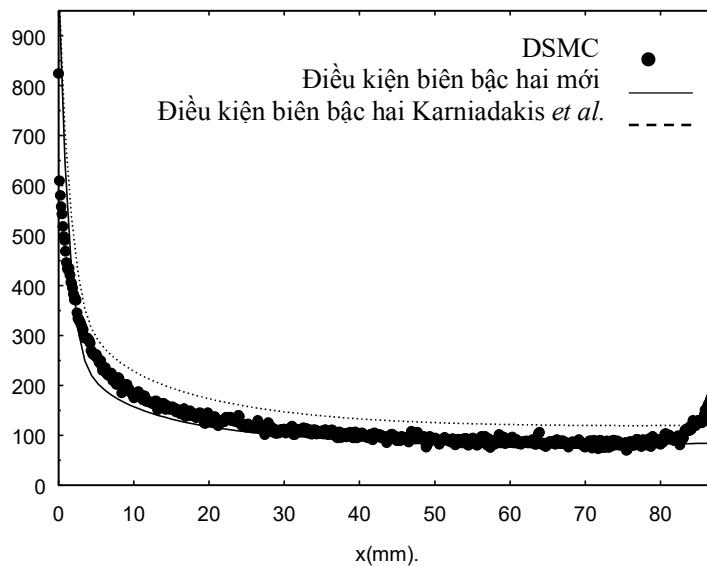


Hình 4: Vận tốc trượt tính toán trên tấm phẳng, khí argon.

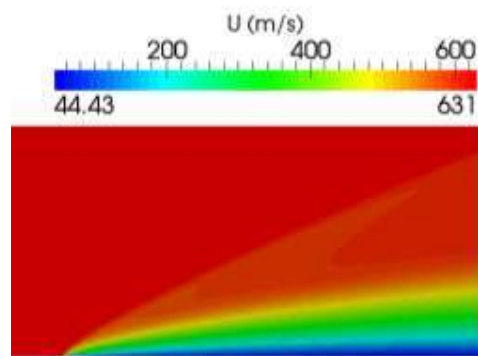
Trong hình 4 dòng khí loãng argon với các giá trị cực đại ở đầu tấm phẳng là 1) 486.31m/s đối với các điều kiện biên vận tốc bậc hai mới 2) 511.09m/s đối với điều kiện biên vận tốc bậc hai Karniadakis *et al.* và 3) 340.36m/s cho dữ liệu DSMC. Sau vị trí đầu tấm phẳng, tất cả chúng giảm nhanh dần đến $x = 8\text{mm}$. Sau đó, tất cả các kết quả mô phỏng CFD gần như không đổi dọc theo tấm phẳng trong khi các DSMC gần như không đổi cho đến vị trí $x = 47\text{mm}$. Tất cả các kết quả mô phỏng CFD gần với dữ liệu DSMC trong khoảng $8\text{mm} \leq x \leq 47\text{mm}$. Sự khác biệt vận tốc trượt tính toán giữa kết quả CFD và DSMC ở gần đuôi tấm phẳng ($x \geq 47\text{mm}$).

Trong hình 5 dòng khí loãng ni-tơ với các giá trị cực đại ở đầu tấm phẳng là 1) 1000.15m/s đối với các điều kiện biên vận tốc bậc hai mới 2) 1012.61m/s đối với điều kiện biên vận tốc bậc hai Karniadakis và 3) 824.17m/s cho dữ liệu DSMC. Sau đó, tất cả chúng giảm nhanh dần đến $x = 10\text{mm}$. Sau vị trí này, tất cả các kết quả mô phỏng CFD gần như không đổi dọc theo tấm phẳng trong khi các DSMC gần như không đổi cho đến vị trí $x = 80\text{mm}$. Tất cả các kết quả mô phỏng CFD gần với dữ liệu DSMC trong khoảng $10\text{mm} \leq x \leq 80\text{mm}$. Sự khác biệt giữa dữ liệu vận tốc trượt CFD và DSMC cho $x \geq 80\text{mm}$. Sự khác biệt giữa dữ liệu CFD và DSMC cho hai trường hợp có thể được giải thích là bởi sự phân tách dòng khí xảy ra gần đuôi tấm phẳng. Phương pháp DSMC có thể mô phỏng được sự phân tách dòng khí trong khi kết quả mô phỏng CFD không thể bởi vì nó được giải quyết bằng các phương trình N-S-F cho dòng chảy tầng trong bộ giải rhoCentralFoam

Trường vận tốc tính toán với khí argon dùng điều kiện biên trượt vận tốc bậc hai mới được hiển thị trong hình 6, để thấy sóng xung kích (shock wave) của dòng khí loãng trên tấm phẳng ở tốc độ cao.



Hình 5: Vận tốc trượt tính toán trên tấm phẳng, khí ni-tơ.

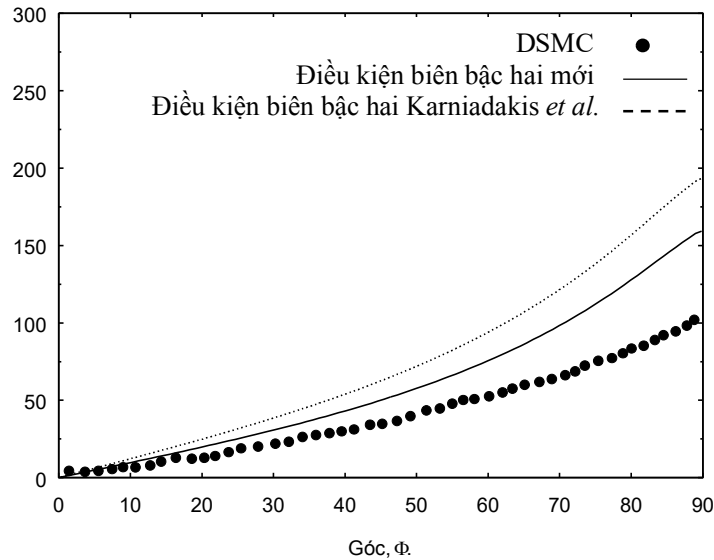


Hình 6: Trường vận tốc và sóng xung kích cho trường hợp tấm phẳng, khí argon.

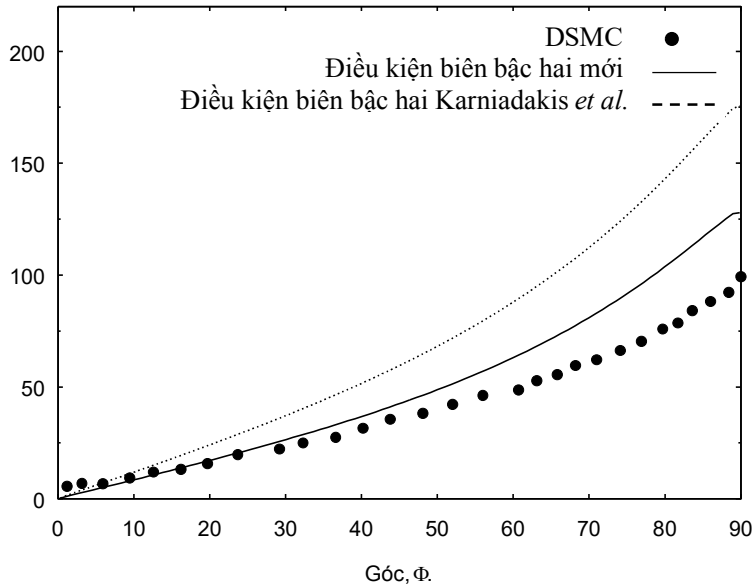
3.2 Trường hợp hình trụ tròn

Vận tốc trượt của hai dòng khí loãng argon và ni-tơ dọc theo bề mặt hình trụ được thể hiện trong hai hình 7 và 8 tương ứng. Tại điểm đỉnh trệ của dòng khí, $\Phi = 0^\circ$, các vận tốc trượt của dòng khí loãng có giá trị xấp xỉ bằng không. Sau đó, chúng tăng dần dọc theo bề mặt hình trụ từ $\Phi = 0^\circ$ đến 90° , và đạt giá trị cực đại tại vị trí $\Phi = 90^\circ$. Các kết quả mô phỏng sử dụng điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai Kardianakis *et al.* đạt được vận tốc trượt cao hơn so với vận tốc trượt dùng điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai mới. Vận tốc trượt sử dụng điều kiện trượt bậc hai mới gần với dữ liệu DSMC, và cải thiện hơn so với kết quả dùng với điều kiện biên trượt bậc hai Kardianakis *et al.* cho cả hai trường hợp.

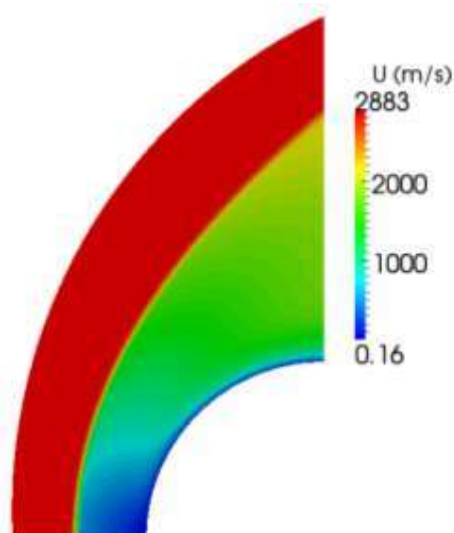
Cuối cùng trường vận tốc tính toán với khí ni-tơ dùng điều kiện biên trượt vận tốc bậc hai mới được trình bày để thấy sóng xung kích cho dòng khí loãng đi ngang qua hình trụ tròn ở tốc độ cao được hiển thị trong hình 9.



Hình 7: Vận tốc trượt tính toán trên bề mặt hình trụ, khí argon.



Hình 8: Vận tốc trượt tính toán trên bề mặt hình trụ, khí ni-tơ.



Hình 9: Trường vận tốc và sóng xung kích cho trường hợp hình trụ tròn, khí ni-to.

3.3 Thảo luận kết quả

Mô hình Karniadakis *et al.* [1] đã được bổ sung cho sự hấp thụ khí đẳng nhiệt Langmuir để đạt được một mô hình chính xác hơn. Giả định bỏ qua về sự tích tụ và ngưng tụ của các hạt khí ở bề mặt rắn không còn đúng do các hạt khí được hấp thụ trên bề mặt rắn. Một khi có sự hấp phụ đẳng nhiệt của các hạt khí ở bề mặt rắn, số lượng hạt khí n_λ và n_w được xác định lại để có được sự cân bằng chính xác của động lượng tiếp tuyến ở bề mặt trượt. Ngoài ra, sự đóng góp của khuếch tán bề mặt gây ra bởi các hạt khí hấp thụ cũng được xem xét để tính toán khoảng cách trung bình tự do ở bề mặt, và một điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai mới đã được phát triển từ các bổ sung này. Từ tất cả các trường hợp CFD được xem xét trong công việc hiện tại, điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai mới dự đoán vận tốc trượt tốt hơn so với điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai Karniadakis *et al.* khi so sánh với dữ liệu DSMC. Điều kiện trượt biên vận tốc trượt bậc hai mới cũng giải quyết vấn đề các hệ số bậc một và bậc hai không đối (i.e. hằng số) trong các điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai Karniadakis *et al.* Hai hệ số này hiện được tính như là một hàm của tỷ lệ độ che phủ bề mặt, θ , nó phụ thuộc vào nhiệt độ bề mặt, T_w và áp suất khí ở bề mặt, p . Khi đó chúng không phải là các giá trị hằng số như các điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai Karniadakis *et al.*, và điều này thực tế hơn so với việc áp dụng các hệ số bậc nhất và bậc hai hằng số dọc theo bề mặt rắn cho các trường hợp mô phỏng CFD.

4 KẾT LUẬN

Sự hấp thụ khí đẳng nhiệt Langmuir đã được đưa vào mô hình Karniadakis *et al.* để đề xuất một mô hình chính xác hơn. Điều này khắc phục nhược điểm của mô hình Karniadakis *et al.* trong việc xác định số hạt khí n_λ và n_w . Sự khuếch tán bề mặt của các hạt khí hấp thụ cũng tham gia vào việc tính toán khoảng cách trung bình tự do của các hạt khí ở bề mặt rắn. Một điều kiện trượt bậc hai mới đã được đề xuất dựa trên mô hình Karniadakis *et al.* hiệu chỉnh để mô phỏng các dòng khí loãng ở tốc độ cao. Vận tốc trượt được dự đoán bởi điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai mới cho kết quả rất tốt khi so sánh với dữ liệu DSMC, và cải thiện kết quả mô phỏng tính toán vận tốc trượt dung điều kiện biên vận tốc trượt bậc hai Karniadakis *et al.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] G. Karniadakis, A. Beskok, and N. Aluru, *Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation*, Springer, 2005.
- [2] K. Yun, R. K. Agarwal and R. Balakrishnan, Hypersonic flow computations in the continuum-transition regime using the augmented Burnett and BGK-Burnett equations. *The Proceedings of the 16th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, Lecture Notes in Physics*, Vol. 515, pp. 560 – 565, 1998.
- [3] Nam. T. P. Le, C.J. Greenshields, J.M. Reese, Evaluation of nonequilibrium boundary condition in simulating hypersonic gas flows, *Progr. Flight Phys.* Vol. 3, pp. 217–230, 2012.
- [4] Nam T. P. Le, A. Shoja Sani, and E. Roohi, Rarefied gas flow simulations of NACA 0012 airfoil and sharp 25o-55o biconic subject to high order nonequilibrium boundary conditions in CFD, *J. Aerospace Science Technology*, Vol. 41, pp. 274 – 288, 2015.
- [5] H. Zhang, Z. Zhang, Y. Zheng, and H. Ye, Corrected second-order slip boundary condition for fluid flows in nanochannels, *Physical Review E*, Vol. 81, 066303, 2010.
- [6] R. S. Myong, Gaseous slip models based on the Langmuir adsorption isotherm, *Physics Fluids*, Vol. 16, 104, 2004.
- [7] D. K. Bhattacharya, and B. C. Eu, Nonlinear transport processes and fluid dynamics: effects of thermoviscous coupling and nonlinear transport coefficients on plane Couette flow of Lennard-Jones fluids, *Physical Review A*, Vol. 35, pp. 821 - 829, 1987.
- [8] Nam T. P. Le, C. White, J. M. Reese, and R. S. Myong, Langmuir-Maxwell and Langmuir-Smoluchowski boundary conditions for thermal gas flow simulations in hypersonic aerodynamics, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 55, pp. 5032 – 5043, 2012.
- [9] G. Zgrablich, V. Pereyra, M. Ponzi and J. Marchese, Connectivity effects of surface diffusion of adsorbed gases, *AIChE J.*, Vol. 32, pp. 1158 - 1165, 1986.
- [10] A. Lofthouse, L. C. Scalabrin, and I. D. Boyd, Velocity slip and temperature jump in hypersonic aerothermodynamics, *J. Thermophysics Heat Transfer*, Vol. 22, pp. 38 – 49, 2008.
- [11] M. Becker, Flat plate flow field and surface measurements from merged layer into transition regime, *Proceedings of the 7th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, pp. 515 – 528, 1969.
- [12] S. C. Metcalf, D. C. Lillicrap, and C. J. Berry, A study of the effect of surface temperature on the shock-layer development over sharp-edge shapes in low-Reynolds-number high-speed flow, *Proceedings of the 7th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, pp 619 – 634, 1969.
- [13] E. H. Kennard, *Kinetic Theory of Gases*, McGraw-Hill Book Company Inc, 1938.
- [14] M. von Smoluchowski, Über wärmeleitung in verdünnten gasen, *Annalen Physik Chemie*, Vol. 64, pp. 101 – 105, 1898.
- [15] S. H. Malsen, On heat transfer in slip flow, *J. Aerospace Sciences*, Vol. 25, pp. 400 – 401, 1958.
- [16] www.openfoam.org, 03/2019.

Ngày nhận bài: 28/05/2019

Ngày chấp nhận đăng: 22/08/2019